

### 1. はじめに

ソフトウェア技術の発達と物理化学現象の解明により、様々な製造プロセスでシミュレーションが利用されるようになってきた。CVD (Chemical Vapor Deposition) 法は半導体デバイス製造過程における超微細加工 (nm~ $\mu$ m サイズ) の主力プロセスとして用いられているが、デバイス開発速度の急速な増加に伴い、CVD プロセスの開発、評価を高速かつ低コストに行うことが強く求められている。このような状況下で、CVD プロセス開発におけるシミュレーションの利用は不可欠なものとなりつつある。しかし、シミュレーションで用いられるアルゴリズムはモンテカルロ法など大きな計算コストを必要とするものが多く、シミュレータの利用の妨げとなっている。

我々は、シミュレータの計算過程における入力条件と計算結果の関係を、情報化学の知見を用いてモデル化 (計算過程のモデル化) すれば、計算コストを劇的に減らすことができ、プロセスシミュレータの利用価値、利用範囲が飛躍的に高められることを示した[1,2]。しかし、モデル化作業はトレーニングデータの作成、シミュレータやモデル化ツールの操作、モデル化結果の評価など、膨大かつ煩雑な作業や、高度な専門知識が要求され、モデル化とシミュレーションを専門としない技術者が作業を行うには大きな困難が伴う。

そこで本研究では、シミュレータとモデリングツールを操作しながら、モデル化作業を自動的に行うソフトウェアエージェント(エージェント)[3]の開発を行い、シミュレータの計算過程を自動的にモデル化するシステムの提案を行った。そして、このシステムを CVD による微細成膜形状を計算するシミュレータに適用し、シミュレータの計算過程が自動的に高精度にモデル化できることを示せたので報告する。

### 2. 自動モデリングシステムの概要

#### 2.1 システムの構造

自動モデリングシステムの構造を図 1 に示す。システムは成膜形状を再現する成膜シミュレータ、汎用的に用いられるモデル化ソフトウェア、これら 2 つのソフトウェアを操作して自動的にモ

デル化作業を行うエージェント (自動モデリングエージェント)によって構成される。

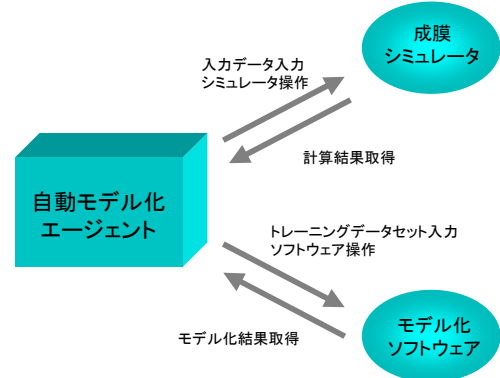


図 1 自動モデリングシステムの構造

#### 2.2 成膜シミュレータ

nm~ $\mu$ m 程度の凹凸のある基板上において生成した膜の断面形状を、モンテカルロ法によって再現するシミュレータである[1]。使用者が直接操作するのが本来の使用方法である。本研究では、基板はトレンチ形状を持つものとした。成膜種(分子)は 1 種類とし、気相中での平均自由行程の大きさはトレンチの大きさに対して十分大きいものとした。図 2 に成膜形状の計算例を示す。

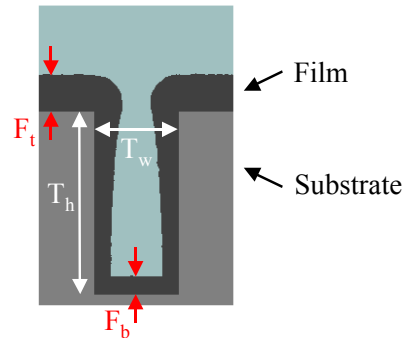


図 2 トレンチ(溝)のある基板上に生成した膜の計算例

( $T_w$ : トレンチの幅,  $T_h$ : トレンチの深さ,  $F_t$ : トレンチ上部での膜厚,  $F_b$ : トレンチ底部での膜厚)

トレンチの形状をあらゆる指標としてトレンチのアスペクト比  $A_s$  を式(1)のように定義した。

$$A_s \equiv \frac{T_h}{T_w} \quad (1)$$

\*ttakah@ipc.shizuoka.ac.jp

また、トレンチ上に成膜した膜の状態を表す指標として式(2)で定義される Stepcoverage (段差被覆性)  $S_t$  を用いた。

$$S_t \equiv \frac{F_b}{F_t} \quad (2)$$

一方、最終的に成膜する量は基板上部での膜厚  $F_t$  によって決められるが、ある程度膜厚が大きくなるとトレンチが内部にボイドを残して膜で埋まってしまうことになり、適切な Stepcoverage を求めることができない。そこで、トレンチの形状に応じてトレンチがふさがらないように膜厚  $F_t$  を決定できるように、入力パラメータ 膜厚比  $R_t$  を式(3)のように定義する。

$$R_t \equiv \frac{F_t}{T_w} \quad (3)$$

以上から、本研究でモデリングに用いられる入力パラメータは、成膜種の付着確率  $\eta$ 、トレンチのアスペクト比  $A_s$ 、膜厚比  $R_t$  の3つとし、出力パラメータは、Stepcoverage  $S_t$  の1つとした。

### 2.3 モデル化ソフトウェア

トレーニングデータを用いてデータの関係をモデル化する汎用的なソフトウェアである。本研究では Chemish を用い、バックプロパゲーション (BP)法に基づくニューラルネットワーク (NN) によるモデル化を用いた。モデル化の際には、Leave-one-out 法を用い、予測的相関係数 Q2 によってモデルを評価した。

### 2.4 自動モデリングエージェント

成膜シミュレータとモデル化ソフトウェアを操作して、成膜シミュレータの計算過程を自動的にモデル化するエージェントである。以下の作業を自律的に人手を介さず実行する。

- (i) シミュレータで利用する入力データを生成する。良好なモデリング結果を得るため、データは偏りが生じないように予め定められた方法で発生させる。
- (ii) シミュレータを操作し、入力データセットを用いて計算を行い、対応する成膜結果を出力データセットとして取得する。
- (iii) シミュレータの入出力データセットを集計し、モデル化ソフトウェア用のトレーニングデータを作成する。
- (iv) モデル化ソフトウェアを操作し、トレーニングデータによりモデリングを行う。
- (v) モデル化ソフトウェアからモデリング結果を取得する。

## 3. 自動モデリング実施例とモデリング能力の評価

開発した自動モデリングシステムを用いて実際に成膜シミュレータの計算過程のモデリングを行った。表1にシミュレータの入力パラメータの発生条件を示す。決められた範囲内で乱数によって値を決定し、入力データセットが作成された。

表1 成膜シミュレータの入力データ発生条件

データ数	500
付着確率 $\eta$	0.005~1.0
アスペクト比 $A_s$	1.5~3.5
膜厚比 $R_t$	0.06~0.45

この入力データセットを用いてシミュレータが実行された。そして、対応する Stepcoverage が得られ、トレーニングデータが作成された。最終的に BP 法に基づく NN によるモデル化が行われた。モデル化の結果を図3に示す。

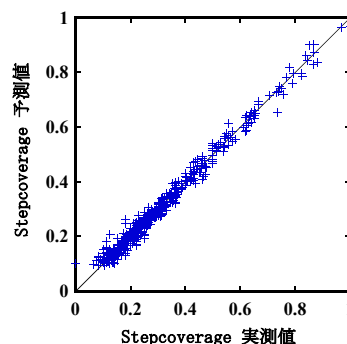


図3 ニューラルネットワークによるモデリングの結果

(実測値: シミュレータによる計算値(トレーニングデータ), 予測値: モデルによって計算した予測値)

Stepcoverage の予測値と実測値のプロットは、対角線上に集まっており、良好な予測性能を持つモデルが得られたことを示している。予測的相関係数 Q2 は 0.982 となり、良好な値を示した。詳細は当日発表する。

### 参考文献

- [1] 高橋ら、第 25 回情化学討論会講演要旨集、JP08 (2002).
- [2] T. Takahashi *et al.*, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 804, 57-62, Materials Research Society (2004).
- [3] ジョゼフ・P・ビーガスら、Java による知的エージェント入門、ソフトバンクパブリッシング (2002).